

XY 模型中涡旋数密度的 Monte Carlo 模拟

钦小平,阮世平

(浙江科技学院 理学院,杭州 310023)

摘要: 应用蒙特卡罗方法,系统地研究了铁磁 XY 模型中涡旋数密度随时间的弛豫过程,仔细分析了序参数和涡旋数密度的临界标度行为。自由涡旋数密度存在幂次律行为,但需要引入修正。测量得到静态临界指数 η ,与理论得到的结果相符合。

关键词: XY 模型;数值模拟;蒙特卡罗方法

中图分类号: O414.22

文献标志码: A

文章编号: 1671-8798(2012)04-0283-04

Monte Carlo simulation of vortex density in XY model

QIN Xiao-ping, RUAN Shi-ping

(School of Sciences, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou 310023, China)

Abstract: With Monte Carlo methods, the dynamic relaxation of vortex density in ferromagnetic XY model is systematically studied. The dynamic scaling behavior of the order parameter and vortex density is carefully analyzed. A power-law behavior of free vortex density is detected but with certain corrections to scaling. The static critical exponent η is obtained, which is in agreement with that from theoretical calculation.

Key words: XY model; numerical simulation; Monte Carlo method

近年来,超薄铁磁材料的动力学特性在理论上和应用上都是研究的热点^[1-2]。理论上,超薄铁磁材料存在各种相变和临界现象,如有序无序相变、KT 相变、钉扎退钉扎相变、弛豫蠕动相变等。应用上,由于计算机技术的快速发展,新型的存储设备和逻辑运算元件的开发都需要用到超薄磁性材料^[2]。特别是最近几年,器件的微型化已经遇到了一定的技术瓶颈,迫切需要新的理论和实验研究。

对铁磁材料的研究,常用的是考虑自旋近邻相互作用的微观格点模型^[3-4],如 Ising 模型、XY 模型、Heisenberg 模型等。Ising 模型是一个标量模型,自旋只有上下两个取向;XY 模型是平面矢量模型,自旋可以在平面内任意转动;Heisenberg 模型自旋可以在三维空间中任意取向。本文研究的是超薄的铁磁材料,因此以二维 XY 模型为例。

收稿日期: 2012-07-28

作者简介: 钦小平(1979—),男,浙江省长兴人,讲师,硕士,主要从事统计物理和计算物理研究。

二维 XY 模型,在任意有限温度,理论上都不存在真正的有序相。其相变类型为 Kosterlitz-Thouless (KT)相变^[5-6]。在 KT 相变温度,系统的空间关联长度指数发散^[1]。在 KT 相变温度以下的整个区域,序参数都具有临界标度行为。一般认为,KT 相变的本质是自由涡旋和涡旋对的相互转变。在 KT 相变温度以下,涡旋以涡旋对的形式存在,随着温度的升高,涡旋对之间的作用键被破坏,涡旋以自由涡旋的形式存在。在过去的研究中,对 KT 相变中的涡旋性质往往只是定性地阐述,缺少定量的计算^[7-11]。本研究将从定量的角度探讨 KT 相变中的涡旋,测量其数密度随时间的演化,从而更好地认识 KT 相变的本质。

1 模型和标度分析

XY 模型是自旋取向局限于平面内且自旋大小恒为 1 的模型,在动力学演化过程中,自旋会发生转动,但其大小不变,其哈密顿量为,

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \tag{1}$$

这里 \mathbf{S}_i 表示格点位置 i 处的自旋矢量, $\langle \cdots \rangle$ 表示最近邻相互作用,对 d 维的系统,每个格点 i 有 $2d$ 个最近邻。 J 表示近邻自旋交换作用能,这里取 $J = 1$ 。

相变的序参数为系统的平均磁化强度 \mathbf{M} ,对 $L \times L$ 的正方点阵,

$$\mathbf{M} = \frac{1}{N} \sum \mathbf{S}_i \tag{2}$$

这里 $N = L^2$,表示点阵总的格点数目。设 $\mathbf{M}(0) = (1, 0)$,即自旋初始方向沿 X 方向,并记 $M(t) = M_x(t)$ 。在 KT 相变温度以下区域,序参数满足幂次律标度行为,

$$M(t) \sim \xi(t)^{-\eta/2} \tag{3}$$

其中 $\xi(t)$ 表示空间关联长度, t 表示蒙特卡罗时间步,一步表示将点阵上所有格点扫描一遍。 η 是静态临界指数,与系统的温度有关; z 是动力学指数,表示系统的动力学弛豫快慢,对二维 XY 模型,理论和数值研究都表明 $z = 2$ 。

理论研究发现,对连续相变的临界动力学,空间关联长度一般具有幂次律标度行为 $\xi(t) \sim t^{1/z}$ 。对短时动力学系统,在系统演化的早期,空间关联长度的标度行为中需引入修正^[4,10-13]。若系统从低温有序态出发,修正比较弱,其形式是幂次的,即

$$\xi(t) \sim t^{1/z} (1 + c/t^b) \tag{4}$$

若系统从高温无序态出发,修正很强,其形式是对数的,即

$$\xi(t) \sim [t/(\ln t + c)]^{1/z} \tag{5}$$

强的对数修正一般认为由涡旋与涡旋对的产生和湮灭引起。涡旋数密度定义如下,

$$n_v(t) = \langle \sum [\theta_i(t) - \theta_j(t)] / 2\pi \rangle \tag{6}$$

其中 θ_i 和 θ_j 表示 t 时刻自旋 \mathbf{S}_i 和 \mathbf{S}_j 的方向角,由于角度的周期性, $\theta_i - \theta_j$ 取值限定在区间 $[-\pi, \pi]$ 内。求和对格点周围顺时针方向四个连接进行, $\langle \cdots \rangle$ 既表示对点阵所有格点求平均,又表示对统计样本平均。在 KT 相变温度附近,涡旋数密度的标度形式为,

$$n_v(t) \sim \xi(t)^{d-\eta} \tag{7}$$

其中 $d = 2$,表示系统的维数。

2 数值模拟

应用蒙特卡罗方法,对二维 XY 模型进行了系统的模拟测量。选取的系统温度为 $T_{KT} = 0.89$,略低于 KT 相变点。点阵大小 $L = 256$,最长演化时间为 $t_{max} = 10\ 240$ 蒙特卡罗步。为了避免有限点阵效应的影响,也模拟了 $L = 128$ 和 $L = 512$ 的情形。总的统计样本数约为 20 000,在处理统计误差时,将样本数据分

成若干组,如果时间方向的误差与样本误差相当或者更大,则计算时也考虑进去。理论上讲,标度行为在演化开始一段时间以后才出现,所以测量指数时要丢弃 t_{\min} 时间步长, t_{\min} 的具体值与模型有关,一般在 $10 \sim 200$ 之间。

系统从高温无序初态淬火到 KT 相变温度附近,整个演化过程中温度保持不变。测量方程(6)所示的涡旋数密度随时间的演化,如图 1 所示。从图 1 可以看到,涡旋数密度随时间衰减。根据无序初态的曲线,用指数曲线去对比,发现其衰减速度比指数形式要慢很多。为了进一步验证该结果,模拟系统从低温有序初态淬火到 KT 相变温度附近的弛豫过程。同样的,测量涡旋数密度随时间的演化,发现涡旋数密度 n_v 随时间增加。在演化初期,增加速度很快,当 $t=100 \sim 200$ 蒙特卡罗步时, n_v 已近似达到稳定值。对有序初态的曲线进行拟合,发现其满足很好的指数关系, $n_v(t)=0.003\ 9-0.004\ 4e^{-0.034t}$ 。

对比有序和无序初态的曲线,可以明显地看到两者不对称,无序初态的曲线变化得要慢很多,当 $t=5\ 000 \sim 10\ 000$ 蒙特卡罗步时,曲线才有趋于稳定值的迹象。这很好地验证了无序初态不符合指数衰减规律。从理论的角度来讲,在 KT 相变温度以上,涡旋以自由涡旋的形式存在;而在 KT 相变温度以下,涡旋以涡旋对的形式存在。图中无序初态的曲线,从高温淬火到 KT 相变温度,因此主要是自由涡旋形式,但由于实际模拟的温度略低于 KT 相变温度,因此,涡旋对在这里同样存在;有序初态的曲线,从低温淬火到 KT 相变温度,主要是涡旋对的形式。无序初态的涡旋数密度弛豫由两部分组成,一是自由涡旋随时间的衰减,另一个是涡旋对随时间的增加。因此,其随时间演化曲线很复杂,不能用简单的函数形式去拟合。

为了进一步验证这一点,采用数据处理中常用的减本底的方法,将无序初态的涡旋数密度减有序初态,得到 $\Delta n_v(t)$,如图 2 所示。从图 2 可以看到,从 $t=40$ 蒙特卡罗步开始, $\Delta n_v(t)$ 曲线具有很好的幂次律行为。直接测量得到曲线的斜率为 $0.735(6)$ 。根据前面的标度分析,从高温态出发,标度行为中有很强的对数修正。将方程(5)中的修正考虑进来,发现拟合得非常好,如图 2 中圆圈所示。结合方程(5)和方程(7),进一步测量得到 $(d-\eta)/z=0.878$ 。这里 $d=2$,表示系统的维数。根据文献中的理论和数值模拟,动力学临界指数 $z=2$,代入可得 $\eta=0.244(2)$ 。根据理论预测结果,在 KT 相变点, $\eta=0.25$ 。两者差别的原因,一是样本统计带来的误差,二是模拟的温度略低于 KT 相变温度,并不是严格的相变点,因为二维 XY 模型没有严格理论解。

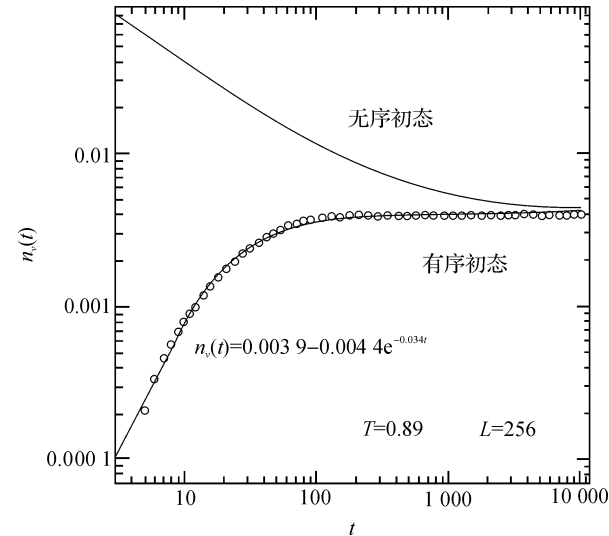


图 1 涡旋数密度随时间的动力学演化
Fig. 1 Dynamic evolution of vortex density

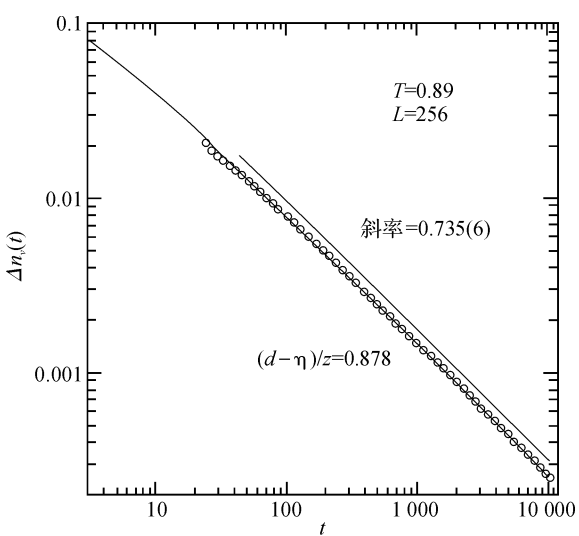


图 2 自由涡旋数密度随时间的动力学演化
Fig. 2 Dynamic evolution of free vortex density

3 结 语

应用蒙特卡罗模拟和短时动力学方法,定量地测量了 KT 相变温度附近 XY 模型的涡旋数密度随时

间的演化。将无序初态减去本底后,自由涡旋数密度随时间的演化具有明显的幂次律行为。测量发现系统存在强的对数修正,验证了理论上修正由涡旋对的产生和湮灭引起的这一观点。修正后得到 $\eta = 0.244(2)$,与理论预测的结果相符合。

参考文献:

- [1] Zheng B. Monte Carlo simulations of short-time critical dynamics [J]. International Journal of Modern Physics B, 1998,12(14):1419-1484.
- [2] Parkin S S P, Hayashi M, Thomas L. Magnetic domain-wall racetrack memory [J]. Science,2008,320(5873):190-194.
- [3] Li Z B, Schülke L, Zheng B. Dynamic Monte Carlo measurement of critical exponents [J]. Physical Review Letters, 1995,74(17):3396-3398.
- [4] Zheng B, Ren f, Ren H. Corrections to scaling in two-dimensional dynamic XY and fully frustrated XY models [J]. Physical Review E,2003,68(4):046120(9pages).
- [5] Kosterlitz J M, Thouless D J. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems [J]. Journal of Physics C: Solid State Physice,1973,6(7):1181-1203.
- [6] Kosterlitz J M. The critical properties of the two-dimensional XY model [J]. Journal of Physics C: Solid State Physice,1974,7(6):1046-1060.
- [7] Nagai T, Yamada H, Konoto M, et al. Direct observation of the spin structures of vortex domain walls in ferromagnetic nanowires [J]. Physical Review B,2008,78(18):180414(R)(4pages).
- [8] Nogawa T, Nemoto K. Abnormal diffusion of single vortex in twodimensional XY model [J]. Journal of the Physical Society of Japan,2009,78(6):064001(6pages).
- [9] Masseboeuf A, Fruchart O, Toussaint J C, et al. Dimensionality crossover in magnetism: From domain walls (2d) to vortices (1d) [J]. Physical Review Letters,2010,104(12):127204(4pages).
- [10] Qin X P, Zheng B, Zhou N J. Dynamic relaxation of topological defect at Kosterlitz-Thouless phase transition [J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical,2011,44(34):345005(15pages).
- [11] He Y Y, Zheng B, Zhou N J. Logarithmic correction to scaling in domain-wall dynamics at Kosterlitz-Thouless phase transitions [J]. Physical Review E,2009,79(2):021107(8pages).
- [12] Bray A J, Briant A J, Jervis D K. Breakdown of scaling in the nonequilibrium critical dynamics of the two-dimensional XY model [J]. Physical Review Letters,2000,84(7):1503-1506.
- [13] Lei X W, Zheng B. Short-time critical dynamics and aging phenomena in the two-dimensional XY model [J]. Physical Review E,2007,75(4):040104(R)(4pages).